特許協力条約

REC'D 03 NOV 2005
WIPO PCT

PCT

特許性に関する国際予備報告（特許協力条約第二章）

（法第12条、法施行規則第56条）
〔ＰＣＴ36条及びＰＣＴ規則70〕

出願人又は代理人の書類記号 PC4926FIP	今後の手続きについては、様式ＰＣＴ／ＩＰＥＡ／４１６を参照すること。	
国際出願番号 ＰＣＴ／ＪＰ２００４／０１２３０１	国際出願日（日．月．年） ２６．０８．２００４	優先日（日．月．年） ３０．０９．２００３
国際特許分類（ＩＰＣ）Int.Cl.^{7} G01J 3/28		
出願人（氏名又は名称）富士通エフ・アイ・ピー株式会社		

1．この報告書は、ＰＣＴ35条に基づきこの国際予備審査機関で作成された国際予備審査報告である。
法施行規則第57条（ＰＣＴ36条）の規定に従い送付する。

2．この国際予備審査報告は、この表紙を含めて全部で 5 ページからなる。

3．この報告には次の附属物件も添付されている。

a．☑ 附属書類は全部で 6 ページである。

☑ 補正されて、この報告の基礎とされた及び／又はこの国際予備審査機関が認めた訂正を含む明細書、請求の範囲及び／又は図面の用紙（ＰＣＴ規則70.16及び実施細則第607号参照）

☐ 第Ｉ欄４．及び補充欄に示したように、出願時における国際出願の開示の範囲を超えた補正を含むものとこの国際予備審査機関が認定した差替え用紙

b．☐ 電子媒体は全部で ______ （電子媒体の種類、数を示す）。
配列表に関する補充欄に示すように、電子形式による配列表又は配列表に関連するテーブルを含む。
（実施細則第802号参照）

4．この国際予備審査報告は、次の内容を含む。

☑ 第Ｉ欄　国際予備審査報告の基礎
☐ 第II欄　優先権
☐ 第III欄　新規性、進歩性又は産業上の利用可能性についての国際予備審査報告の不作成
☐ 第IV欄　発明の単一性の欠如
☑ 第Ｖ欄　ＰＣＴ35条(2)に規定する新規性、進歩性又は産業上の利用可能性についての見解、それを裏付けるための文献及び説明
☐ 第VI欄　ある種の引用文献
☑ 第VII欄　国際出願の不備
☑ 第VIII欄　国際出願に対する意見

国際予備審査の請求書を受理した日 ０６．０７．２００５	国際予備審査報告を作成した日 １９．１０．２００５
名称及びあて先 日本国特許庁（ＩＰＥＡ／ＪＰ） 郵便番号１００－８９１５ 東京都千代田区霞が関三丁目４番３号	特許庁審査官（権限のある職員） ２Ｗ ２９１０ 髙場　正光 電話番号 ０３－３５８１－１１０１ 内線 ３２９２

様式ＰＣＴ／ＩＰＥＡ／４０９（表紙）（２００５年４月）

特許性に関する国際予備報告

国際出願番号　PCT／JP2004／012301

第I欄　報告の基礎

1．言語に関し、この予備審査報告は以下のものを基礎とした。

- [x] 出願時の言語による国際出願
- [ ] 出願時の言語から次の目的のための言語である＿＿＿＿＿語に翻訳された、この国際出願の翻訳文
  - [ ] 国際調査（PCT規則12.3(a)及び23.1(b)）
  - [ ] 国際公開（PCT規則12.4(a)）
  - [ ] 国際予備審査（PCT規則55.2(a)又は55.3(a)）

2．この報告は下記の出願書類を基礎とした。（法第6条（PCT14条）の規定に基づく命令に応答するために提出された差替え用紙は、この報告において「出願時」とし、この報告に添付していない。）

- [ ] 出願時の国際出願書類

- [x] 明細書

  第　1－12　ページ、出願時に提出されたもの
  第＿＿＿＿ページ*、＿＿＿＿付けで国際予備審査機関が受理したもの
  第＿＿＿＿ページ*、＿＿＿＿付けで国際予備審査機関が受理したもの

- [x] 請求の範囲

  第＿＿＿＿項、出願時に提出されたもの
  第　1－15　項*、PCT19条の規定に基づき補正されたもの
  第＿＿＿＿項*、＿＿＿＿付けで国際予備審査機関が受理したもの
  第＿＿＿＿項*、＿＿＿＿付けで国際予備審査機関が受理したもの

- [x] 図面

  第　1－2　~~ページ／~~図、出願時に提出されたもの
  第＿＿＿＿ページ／図*、＿＿＿＿付けで国際予備審査機関が受理したもの
  第＿＿＿＿ページ／図*、＿＿＿＿付けで国際予備審査機関が受理したもの

- [ ] 配列表又は関連するテーブル
  配列表に関する補充欄を参照すること。

3．[ ] 補正により、下記の書類が削除された。

- [ ] 明細書　第＿＿＿＿ページ
- [ ] 請求の範囲　第＿＿＿＿項
- [ ] 図面　第＿＿＿＿ページ／図
- [ ] 配列表（具体的に記載すること）＿＿＿＿
- [ ] 配列表に関連するテーブル（具体的に記載すること）＿＿＿＿

4．[ ] この報告は、補充欄に示したように、この報告に添付されかつ以下に示した補正が出願時における開示の範囲を超えてされたものと認められるので、その補正がされなかったものとして作成した。（PCT規則70.2(c)）

- [ ] 明細書　第＿＿＿＿ページ
- [ ] 請求の範囲　第＿＿＿＿項
- [ ] 図面　第＿＿＿＿ページ／図
- [ ] 配列表（具体的に記載すること）＿＿＿＿
- [ ] 配列表に関連するテーブル（具体的に記載すること）＿＿＿＿

＊4．に該当する場合、その用紙に "superseded" と記入されることがある。

特許性に関する国際予備報告

国際出願番号 PCT／JP2004／012301

第Ⅴ欄 新規性、進歩性又は産業上の利用可能性についての法第12条（PCT35条(2)）に定める見解、それを裏付ける文献及び説明

1．見解

新規性（N）	請求の範囲	1－15	有
	請求の範囲		無
進歩性（IS）	請求の範囲	1－15	有
	請求の範囲		無
産業上の利用可能性（IA）	請求の範囲	1－15	有
	請求の範囲		無

2．文献及び説明（PCT規則70.7）

（1）新規性及び進歩性について

請求の範囲１－１５に係る発明は、国際調査報告で引用された何れの文献にも開示されておらず、新規性を有する。特に、

フォークト関数をピーク近傍の第１の範囲と、該第１の範囲に含まれない裾部分とに分け、該第１の範囲を３次関数で置き換え、該裾部分をフォークト関数として等間隔の所定の範囲で計算し、さらに第１の範囲のピーク近傍を３次関数で置き換え、裾部分をフォークト関数と３次関数の差の関数として前記第１の所定の間隔より狭い第２の所定の間隔で計算する構成

は、何れの文献にも開示されていない。

さらに、請求の範囲１－１５に係る発明は、国際調査報告で引用された文献に対して進歩性を有する。本願発明は、上記の構成によりライン・バイ・ライン計算を高速化するという有利な効果を発揮する。

（2）産業上の利用可能性について

請求項１－１５に係る発明は、複数の吸収線があるスペクトルについて行うライン・バイ・ライン計算を高速化するためのものとして、産業上の利用可能性を有する。

第Ⅶ欄　国際出願の不備

この国際出願の形式又は内容について、次の不備を発見した。

請求の範囲１０の記載において、「K(x, y) f(x)がである」なる誤記が存在する。

第VIII欄　国際出願に対する意見

請求の範囲、明細書及び図面の明瞭性又は請求の範囲の明細書による十分な裏付についての意見を次に示す。

１．請求の範囲３，１５

段階（６）によって計算された結果が、次回の（４）ないし（６）にどのように反映されるのか記載されていないため、なぜ「（４）ないし（７）」を単に繰り返すことによって、「第３の所定の間隔になる」ことができるのか、技術的に明確でない。

２．請求の範囲５，６

「γ／４程度」なる、発明の範囲を不明確にする表現が存在する。

３．請求の範囲９－１１

フォーク卜関数は１つの複素数変数を引数とするものであるから、変数ｙの意味が明確でない（ｙが前記複素数変数の虚部であることは、請求の範囲の記載としては、請求の範囲１２にのみ記載されている）。

請求の範囲

[1] (補正後) 多数の重なり合う吸収線のライン・バイ・ライン計算の高速化方法であって、該方法は、

(1) 吸収線の形状を表わすフォークト関数の対象範囲を、フォークト関数のピーク近傍の第1の範囲および第1の範囲に含まれない裾部分に分けて、第1の範囲を、前記フォークト関数との接続点において、前記フォークト関数と関数の値及び微分値が一致する3次関数で代替し、第1の所定の間隔ごとに該3次関数と裾部分のフォークト関数の値及び微分値を計算する段階と、

(2) 複数の吸収線について前記(1)の結果を足し合わせる段階と、

(3) 前記(2)の結果を補間して前記第1の所定の間隔より狭い第2の所定の間隔で関数値及び微分値を計算する段階と、

(4) 前記第1の範囲をピーク近傍の第2の範囲と第2の範囲に含まれない裾部分に分けて、「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の該第2の範囲を、前記「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」との接続点において、前記「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の関数の値及び微分値が一致する第2の3次関数で代替し、前記第2の所定の間隔ごとに該第2の範囲を代替した該第2の3次関数と裾部分の該「フォークト関数と前記第2の3次関数の差の関数」の値及び微分値を計算する段階と、

(5) 複数の吸収線について前記(4)の結果を前記(3)の結果に足し合わせる段階と、

(6) 前記(5)の結果を補間して前記第2の所定の間隔より狭い間隔で関数値及び微分値を計算する段階と、

(7) 前記第2の範囲において複数の吸収線について「フォークト関数と前記第2の3次関数の差の関数」の値を前記(6)の結果に足し合わせる段階と、

を有する方法。

[2] (補正後) (8) 最小単位の間隔になるまで間隔を狭めながら補間により関数値、微分値を計算する段階を繰り返す請求項1に記載の方法。

[3] (補正後) 前記(6)の段階における「前記第2の所定の間隔より狭い間隔」が第3の

所定の間隔になるまで前記(4)ないし(6)に記載された段階を1回以上繰り返す請求項1に記載の方法。

[4]　(補正後)前記所定の間隔は以下の式を用いて決定する請求項1に記載の方法。

前記第1の所定の間隔は、$j^{kmax}d\nu$ である。ここで、jは1桁の自然数、$d\nu$ は波数の増分、kmaxは、$j^{kmax+2}pd\nu \leqq Vmax$

を満たす自然数である。ただし、Vmax は吸収線中心からの計算範囲で最大のもの、pは計算精度を制御する自然数である。

[5]　(補正後)前記所定の間隔は以下の式を用いて決定する請求項3に記載の方法。

第3の所定の間隔は、$j^{kmin}d\nu$ である。ここで、jは1桁の自然数、$d\nu$ は波数の増分、kminは、$j^{kmin}pd\nu \leqq \alpha$ (α は γ／4程度)を満たす最大の非負の整数である。ただし、γ は吸収線の半値幅の近似値、pは計算精度を制御する自然数である。

[6]　(補正後)前記第2の所定の間隔は以下の式を用いて決定する請求項1に記載の方法。

第k－kmin＋1番目に狭い幅の所定の間隔は、$j^{k}d\nu$ である。ここで、jは1桁の自然数、$d\nu$ は波数の増分、kはkmin≦k＜kmaxである。kmaxは、$j^{kmax+2}pd\nu \leqq Vmax$ を満たす自然数である。ただし、Vmaxは吸収線中心からの計算範囲で最大のもの、pは計算精度を制御する自然数である。kminは、$j^{kmin}pd\nu \leqq \alpha$ (α は γ／4程度)を満たす最大の非負の整数である。ただし、γ は吸収線の半値幅の近似値、pは計算精度を制御する自然数である。

[7]　(補正後)前記補間は、補間区間を4等分し、補間区間(x_0、x_1)において4分割する点の関数値をy_a、y_b、y_c、およびその微分値をy_a'、y_b'、y_c'とし、x_0、x_1での関数値y_0、y_1及び関数微分値y_0'、y_1'を用いて、以下の(1)式は関数値の補間式、(2)式は関数微分値の補間式、ε を非負の小数として計算する請求項1ないし3のいずれかに記載の方法。

$$\begin{pmatrix} y_a \\ y_b \\ y_c \end{pmatrix} = \frac{1}{64}\begin{pmatrix} 54-6\varepsilon & 10+6\varepsilon & 9(1-\varepsilon) & -3(1-\varepsilon) \\ 32 & 32 & 8(1-\varepsilon) & -8(1-\varepsilon) \\ 10+6\varepsilon & 54-6\varepsilon & 3(1-\varepsilon) & -9(1-\varepsilon) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1-x_0)y_0' \\ (x_1-x_0)y_1' \end{pmatrix} \qquad (1)$$

日本国特許庁　23. 8. 2005

$$\begin{pmatrix} y'_a \\ y'_b \\ y'_c \end{pmatrix} = \frac{1}{16(x_1-x_0)} \begin{pmatrix} -18+2\varepsilon & 18-2\varepsilon & 3(1-\varepsilon) & -5(1-\varepsilon) \\ -24+8\varepsilon & 24-8\varepsilon & -4(1-\varepsilon) & -4(1-\varepsilon) \\ -18+2\varepsilon & 18-2\varepsilon & -5(1-\varepsilon) & 3(1-\varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1-x_0)\,y'_0 \\ (x_1-x_0)\,y'_1 \end{pmatrix} \quad (2)$$

[8].　(補正後) 前記補間は、補間区間を5等分し、補間区間 (x_0、x_1) において5分割する点の関数値をy_a、y_b、y_c、y_d、およびその微分値をy_a'、y_b'、y_c'、y_d'とし、x_0、x_1での関数値y_0、y_1及び関数微分値y_0'、y_1'を用いて、以下の(3)式は関数値の補間式、(4)式は関数微分値の補間式、εを非負の小数として計算する請求項1ないし3のいずれかに記載の方法。

$$\begin{pmatrix} y_a \\ y_b \\ y_c \\ y_d \end{pmatrix} = \frac{1}{125} \begin{pmatrix} 112-12\varepsilon & 13+12\varepsilon & 16(1-\varepsilon) & -4(1-\varepsilon) \\ 81-6\varepsilon & 44+6\varepsilon & 18(1-\varepsilon) & -12(1-\varepsilon) \\ 44+6\varepsilon & 81-6\varepsilon & 12(1-\varepsilon) & -18(1-\varepsilon) \\ 13+12\varepsilon & 112-12\varepsilon & 4(1-\varepsilon) & -16(1-\varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1-x_0)\,y'_0 \\ (x_1-x_0)\,y'_1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

$$\begin{pmatrix} y'_a \\ y'_b \\ y'_c \\ y'_d \end{pmatrix} = \frac{1}{25(x_1-x_0)} \begin{pmatrix} -24-\varepsilon & 24+\varepsilon & 8(1-\varepsilon) & -7(1-\varepsilon) \\ -36+11\varepsilon & 36-11\varepsilon & -3(1-\varepsilon) & -8(1-\varepsilon) \\ -36+11\varepsilon & 36-11\varepsilon & -8(1-\varepsilon) & -3(1-\varepsilon) \\ -24-\varepsilon & 24+\varepsilon & -7(1-\varepsilon) & 8(1-\varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1-x_0)\,y'_0 \\ (x_1-x_0)\,y'_1 \end{pmatrix} \quad (4)$$

[9]　(補正後) フォークト関数をK(x,y)とし、吸収線のフォークト線形からずれた吸収線の形がK(x,y)+f(x)であるとき、

$$K(x,y)$$

を

$$\tilde{K}(x,y) = A\,K(x,y) + B\,f(x)、$$

$$\frac{\partial K(x,y)}{\partial x}$$

を

日本国特許庁　23. 8. 2005

$$\frac{\partial \tilde{K}(x,y)}{\partial x} = A\frac{\partial K(x,y)}{\partial x} + B\frac{\partial f(x)}{\partial x}$$

で置き換えることによってライン・バイ・ライン計算を高速化する請求項1ないし8に記載の方法。

[10]　（補正後）フォークト関数をK(x,y)とし、フォークト線形からずれた吸収線の形がK(x,y)f(x)がであるとき、

$$K(x,y)$$

を

$$\tilde{K}(x,y) = K(x,y)\,f(x)、$$

$$\frac{\partial K(x,y)}{\partial x}$$

を

$$\frac{\partial \tilde{K}(x,y)}{\partial x} = \frac{\partial K(x,y)}{\partial x} f(x) + K(x,y)\frac{\partial f(x)}{\partial x}$$

で置き換えることによってライン・バイ・ライン計算を高速化する請求項1ないし8に記載の方法。

[11]　（補正後）サブローレンツィアン補正について、

$$\tilde{K}(x,y) = K(x,y)\,A\exp(-B\,|\,x\,|)、$$

および

$$\frac{\partial \tilde{K}(x,y)}{\partial x} = \frac{\partial K(x,y)}{\partial x} A\exp(-B\,|\,x\,|) + K(x,y)\left[-\mathrm{sgn}(x)AB\exp(-B\,|\,x\,|)\right]$$

を利用してライン・バイ・ライン計算を高速化する請求項10に記載の方法。

[12]　（補正後）ラインミキシング補正について、以下に表す式で置き換えることによってラ

イン・バイ・ライン計算を高速化する請求項9に記載の方法。

$$K(x, y)$$

を

$$\tilde{K}(x, y) = A K(x, y) + B L(x, y)、$$

$$\frac{\partial K(x, y)}{\partial x}$$

を

$$\frac{\partial \tilde{K}(x, y)}{\partial x} = -2\left[(A x + B y)K(x, y) - (A y - B x)L(x, y) - \frac{B}{\sqrt{\pi}}\right]、$$

ここでL(x,y)は次式で定義される、複素数z=x+iyの関数w(z)の虚数成分である（実数部分はフォークト関数）。

$$w(z) = \frac{i}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-t^2)}{z - t} dt = \exp(-z^2)\, erfc(-iz) = K(x, y) + i L(x, y)$$

（erfc(z)は複素相補誤差関数）

[13]　（補正後）多数の重なり合う吸収線のライン・バイ・ライン計算の高速化プログラムであって、該プログラムは、

（1）吸収線の形状を表わすフォークト関数の対象範囲を、フォークト関数のピーク近傍の第1の範囲および第1の範囲に含まれない裾部分に分けて、第1の範囲を、前記フォークト関数との接続点において、前記フォークト関数と関数の値及び微分値が一致する3次関数で代替し、第1の所定の間隔ごとに該3次関数と裾部分のフォークト関数の値及び微分値を計算する段階と、

（2）複数の吸収線について前記（1）の結果を足し合わせる段階と、

（3）前記（2）の結果を補間して前記第1の所定の間隔より狭い第2の所定の間隔で関数値及び微分値を計算する段階と、

(4)前記第1の範囲をピーク近傍の第2の範囲と第2の範囲に含まれない裾部分に分けて、「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の該第2の範囲を、前記「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」との接続点において、前記「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の関数の値及び微分値が一致する第2の3次関数で代替し、前記第2の所定の間隔ごとに該第2の範囲を代替した該第2の3次関数と裾部分の該「フォークト関数と前記第2の3次関数の差の関数」の値及び微分値を計算する段階と、

(5)複数の吸収線について前記(4)の結果を前記(3)の結果に足し合わせる段階と、

(6)前記(5)の結果を補間して前記第2の所定の間隔より狭い間隔で関数値及び微分値を計算する段階と、

(7)前記第2の範囲において複数の吸収線について「フォークト関数と前記第2の3次関数の差の関数」の値を前記(6)の結果に足し合わせる段階と、

を有するプログラム。

[14] (補正後)最小単位の間隔になるまで間隔を狭めながら補間により関数値、微分値を計算する段階を繰り返す請求項13に記載のプログラム。

[15] (補正後)前記(6)の段階における「前記第2の所定の間隔より狭い間隔」が第3の所定の間隔になるまで前記(4)ないし(6)に記載された段階を1回以上繰り返す請求項13に記載のプログラム。